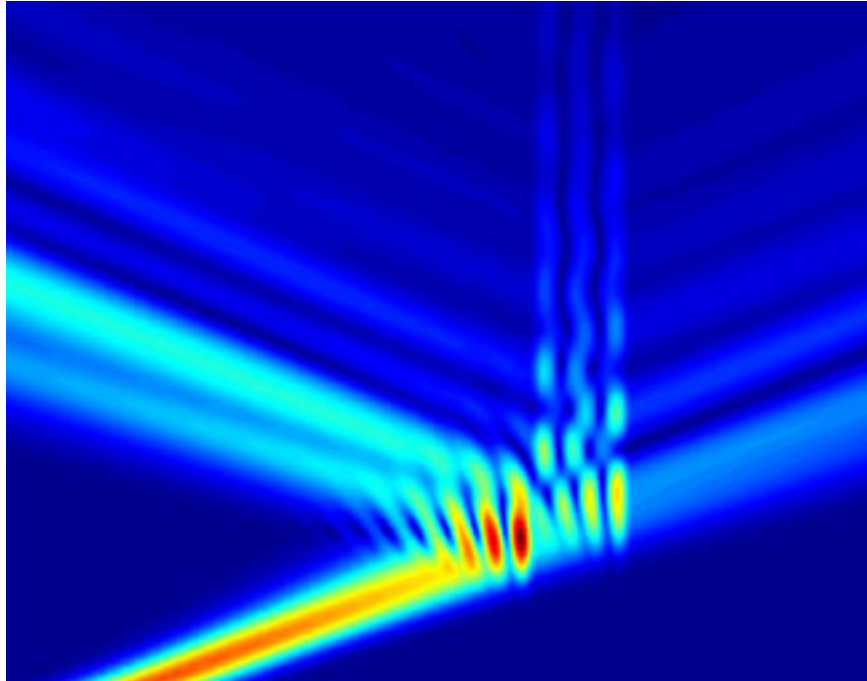


Estudi del transport electrònic en la nanoescala

06/2007 - **Física.** La mecànica quàntica descriu amb precisió el comportament del món nanoscòpic, però en la pràctica només podem resoldre les seves equacions per a sistemes molt senzills, de dues o tres partícules. Científics de la UAB han ideat un nou mètode de càlcul per a sistemes de moltes partícules, útil per al disseny dels dispositius electrònics del futur.



Les prediccions sobre sistemes de moltes partícules en escenaris on es manifesta la seva naturalesa quàntica apareixen generalment en els titulars dels diaris científics perquè contenen propietats exòtiques sense homòleg clàssic. En principi, la informació física d'aquests sistemes es pot obtenir directament resolent la funció d'ona de moltes partícules solució de l'equació Schrödinger. Tanmateix, des d'un punt de vista computacional, aquest càlcul és només accessible per a sistemes amb molt poques partícules (per exemple àtoms elementals amb dos, tres electrons). Aquesta barrera computacional és el motiu per el qual molts d'aquest sistemes romanen encara inexplorats i són actualment un important focus d'activitat de recerca, tant teòrica com experiment.

Les aproximacions més àmpliament utilitzades per estudiar, en detall, aquests sistemes quàntics de moltes partícules es basen en la *Density Functional Theory* o en el mètode de Hartree-Fock. Per contra, en aquest treball proposem una aproximació alternativa que també permet superar la barrera computacional que hem mencionat. Presentem un mètode per estudiar sistemes de moltes partícules a través de trajectòries de Bohm. Demostrem que les trajectòries de Bohm associades a un sistema de N electrons es poden calcular exactament sense saber la funció d'ona de moltes partícules, però resolent un sistema acoblat de N equacions de Schrödinger d'un sol electró. El punt destacat de la nostra proposta és que el sistema acoblat és numèricament accessible per a centenars d'electrons. El temps de càlcul de les trajectòries quàntiques utilitzant el nostre algoritme augmenta com a potència de N , mentre que una solució exacta de l'equació de Schrödinger de N partícules exigeix un temps molt més gran que augmenta exponencialment amb N . El treball ha estat publicat recentment en la revista *Physical Review Letters* i el càlcul numèric que suporta les conclusions s'ha realitzat amb el suport del Servei d'Informàtica Distribuïda del campus de Sabadell.

En particular, hem utilitzat el mencionat algoritme per el càlcul de propietats de transport en sistemes de molts electrons amb interaccions d'intercanvi i de Coulomb entre tots els electrons. En aquest sentit, l'algoritme permet la simulació acurada de les propietats estàtiques, dinàmiques i de soroll dels transistors d'efecte de camp nanomètrics que se utilitzaran en un futur immediat. En general, l'algoritme també permet estudiar altres sistemes quàntics de moltes partícules de gran interès actualment en disciplines com estat-sòlid, òptica-quàntica, química-física, etc.

Xavier Oriols

Departament d'Enginyeria Electrònica

Universitat Autònoma de Barcelona

Oriols, X, "Quantum-trajectory approach to time-dependent transport in mesoscopic systems with electron-electron interactions", PHYSICAL REVIEW LETTERS, **98**: 066803 FEB 9 (2007)